

2014 年度修士論文要旨

減衰全反射遠紫外分光法と量子化学計算を用いた凝集相におけるベンゼン及び一置換ベンゼンの電子状態の研究

関西学院大学大学院理工学研究科

化学専攻 尾崎研究室 植松 祐貴

ベンゼン及び置換ベンゼンは極めて基礎的な化合物であるが、実験的困難より、凝集相におけるそれらの電子状態は明らかにされていなかった。当研究室で開発した減衰全反射遠紫外（ATR-FUV）分光器により、液体・固体試料の遠紫外スペクトル測定が可能になった。そこで ATR-FUV 分光器を用いて、ベンゼンと一置換ベンゼン 7 種の純液体及び希釈溶液の遠紫外スペクトルを測定し、量子化学計算により吸収バンドの帰属を行った。置換基によっては、ベンゼン環の $\pi \rightarrow \pi^*$ 遷移とは異なる電子遷移による、吸収バンドが観測された。また、温度変化プローブを用いて、ベンゼン純液体の冷却により結晶ベンゼンを作製し、その遠紫外スペクトルを測定した。結晶ベンゼンの遠紫外スペクトル測定は、世界初である。実験結果と量子化学計算により、これまで報告されていた気体ベンゼンと比較した場合、結晶ベンゼンでは分子間相互作用によって電子状態が変化することが明らかになった。